

高温稀薄气体  
热化学非平衡流动的  
DSMC方法



国防科技大学出版社

★ 国家“九五”重点图书  
高科技与工程计算丛书

国防科技大学  
学术著作专项  
经费资助出版

# 高温稀薄气体热化学非平衡 流动的 DSMC 方法

吴其芬 陈伟芳 著

国防科技大学出版社  
· 长沙 ·

## 图书在版编目(CIP)数据

高温稀薄气体热化学非平衡流动的 DSMC 方法/吴其芬, 陈伟芳. 长沙: 国防科技大学出版社, 1999. 6

ISBN 7-81024-535-X

I. 高… II. 吴… III. 高温气体; 稀薄气体-热学-非平衡流-蒙特卡罗法 IV. O354

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 24425 号

国防科技大学出版社出版发行

电话: (0731) 4555681 邮政编码: 410073

E-mail: gfkdcbs@public.cs.hn.cn

责任编辑: 石少平 责任校对: 黄八一 张 静

新华书店总店北京发行所经销

国防科技大学印刷厂印装

\*

850×1168 1/32 印张: 9.5 字数: 239 千

1999 年 6 月第 1 版第 1 次印刷 印数: 1-500 册

\*

定价: 18.00 元

## 内容简介

本书系统地介绍了蒙特卡罗直接仿真(DSMC, Direct Simulation Monte-Carlo)方法的基本概念、基本原理及其在高温稀薄气体热化学非平衡流动中的应用。全书共分五章。第一章讨论与本书相关的稀薄气体力学的概念、原理和基本方法,并对稀薄气体力学问题求解法作了扼要评述。第二章介绍构造DSMC程序相关的原理,建立仿真气体热化学反应流动的基本框架。第三章讨论由无结构分子组成的稀薄气体流动的DSMC方法,着重介绍碰撞分子抽样及碰撞计算。第四章讨论各种内自由度能量松弛抽样几率函数的构造及非弹性碰撞的计算。最后一章讨论各种化学反应抽样几率函数的构造及反应碰撞的计算,着重介绍细致平衡原理在化学反应流的DSMC方法中的应用。

本书叙述深入浅出,思路清晰;既有对基本原理和方法的系统论述,又有对原理和方法的数值验证及仿真实例;既是DSMC方法的入门书,又是DSMC方法应用的专题论著。本书可作为力学及物理有关专业的研究生教材,也可供有关师生及科研人员参考。

# 前 言

自从 Baganoff D 和 McDonald J D 于 1990 年在理论和数值实验两方面论证了非平衡过程的碰撞对抽样几率函数可以用平衡态下的几率函数高精度近似之后,由 Bird G A 于 1963 年首先提出的 DSMC 方法及其原理已成熟。人们确信能够有效而成功地应用 DSMC 方法模拟高温热化学非平衡气体流动过程,并成为当今稀薄气体力学和化学动力学研究的热点课题。研究集中在如何实现对非平衡反应过程的 DSMC 方法仿真的核心问题,即如何正确地构造反映物理化学过程本质的反应抽样几率函数以及反应后碰撞计算这两个方面上。或者由于理论尚未达到实用阶段或者由于对计算条件要求过于苛刻等原因,着眼于从一次特定碰撞行为内在机理的微观分析出发,难以构造得到适合于 DSMC 方法的反应抽样几率函数和反应后碰撞计算模型,研究者转向现象学方法,即通过对大量过程的考察后提出一种对大量过程统计结果进行描述的方法。应用现象学方法构造反应抽样几率函数的具体操作过程首先是通过微观分析方法推导得到反应几率的表达式形式,然后将反应几率的统计平均结果与从宏观考察得到的相应的反应速率相匹配,最后确定出出现在反应抽样几率函数中的待定常数。类似地,依据宏观方法的结论,研究者亦构造得到各种反应后的碰撞计算模型。显然现象学方法是符合微观方法和宏观方法相统一的哲学原理,因此能够得到正确的宏观量以及反应系统过程的集体表现。1981 年 Bird G A 首先提出可变硬球以及通过输运系数确定碰撞截面的现象学方法,改进了由无结构分子组成的气体流动的碰撞对抽样几率函数。随后不同作者按照现象学的思想方法构造出

各自的关于各种内能松弛过程以及各种化学反应的抽样几率函数。1975 年, Larsen P S 和 Borgnakke C 提出按照能量守恒原则将碰撞分子能量依照平衡分布的方式重新分配给碰撞后分子内能的松弛碰撞计算模型。在这基础之上, 1992 年 Hass B L 提出按有效自由度比例分配能量的原则将反应能分配到参与反应分子的各自由度上, 实现了化学反应碰撞计算。本书除对 DSMC 方法原理作必要的简介外, 正是力图遵循思维逻辑以反应抽样几率函数和反应后碰撞计算的构造为主线进行叙述, 给出各个反应过程的抽样几率函数和碰撞计算的严谨推导, 使其自成系统。全书共分五章。头两章为基础内容, 叙述构造稀薄气体热化学非平衡流动 DSMC 方法的基本原理及技巧。第三章叙述无反应气体流动的 DSMC 方法, 同时介绍了适合于并行计算的 Baganoff D, McDonald J D 和 Bird G A 的抽样方法以及物面边界的处理方法。第四、五两章为本书的主体, 应用前三章叙述的基本原理及方法分别实现对具有热力学内自由度松弛和化学反应的气体流动实施 DSMC 方法仿真。特别介绍了由于抽样引起的能量分布的偏倚和化学反应细致平衡原理在构造反应抽样几率函数和反应碰撞计算中的应用; 介绍了双原子分子振动激发与离解反应的耦合模型以及电离气体流动的 DSMC 方法。在后面三章的末尾都给出了若干仿真实例以及书中对一些反应抽样几率可信度的数值试验, 旨在说明 DSMC 方法是一种可靠而高效的方法。

作者特别感谢石少平博士, 正是由于石博士认真而细致的编辑与审查, 避免了许多错误和纰漏。任兵教授、石于中副教授和黄琳博士都曾对书稿提出不少的修改意见, 一并致以深切的谢意。

由于作者学识浅陋, 错误在所难免, 敬请读者斧正。

作者

1999 年 3 月

# 目 录

|                                         |      |
|-----------------------------------------|------|
| 第一章 绪论                                  | (1)  |
| § 1.1 流动分区                              | (1)  |
| § 1.2 速度分布函数                            | (5)  |
| § 1.3 稀薄气体流动的控制方程——Boltzmann 方程         | (9)  |
| § 1.4 稀薄气体动力学问题求解方法的历史回顾                | (11) |
| § 1.4.1 小引                              | (11) |
| § 1.4.2 Boltzmann 方程的近似解法               | (12) |
| § 1.4.3 Monte-Carlo 方法的基本思想及特点          | (16) |
| § 1.4.4 求解 Boltzmann 方程的 Monte-Carlo 方法 | (19) |
| § 1.5 高温稀薄气体热化学非平衡流动 DSMC 方法的研究现状       | (24) |
| 第二章 气体热化学非平衡流动的 DSMC 方法基础               | (29) |
| § 2.1 分子特性                              | (29) |
| § 2.1.1 分子特征量                           | (29) |
| § 2.1.2 能量模式                            | (30) |
| § 2.1.3 碰撞参数                            | (34) |
| § 2.2 能量分布函数                            | (35) |
| § 2.2.1 Maxwell-Boltzmann 能量分布函数        | (35) |
| § 2.2.2 平均能量和有效自由度                      | (36) |
| § 2.2.3 能量联合分布函数                        | (38) |
| § 2.3 随机抽样技术                            | (39) |
| § 2.3.1 实现从已知分布函数的集合中抽样                 | (39) |
| § 2.3.2 由于抽样引起的分布函数的偏倚                  | (41) |
| § 2.4 混合气体特性                            | (42) |
| § 2.4.1 混合气体宏观特征量                       | (42) |

|         |                                                |      |
|---------|------------------------------------------------|------|
| § 2.4.2 | 混合气体微观特征量 .....                                | (45) |
| § 2.5   | 热力学碰撞传能及化学反应类型 .....                           | (46) |
| § 2.5.1 | 热力学碰撞传能类型 .....                                | (46) |
| § 2.5.2 | 高温纯空气化学反应类型 .....                              | (48) |
| § 2.6   | DSMC 方法程序流程及说明 .....                           | (54) |
| § 2.6.1 | 稀薄气体流动的 DSMC 方法仿真方案 .....                      | (54) |
| § 2.6.2 | 热力学碰撞传能的 DSMC 方法仿真方案 .....                     | (58) |
| § 2.6.3 | 气体分子化学反应的 DSMC 方法仿真方案 .....                    | (59) |
| § 2.7   | DSMC 方法中程式化处理 .....                            | (61) |
| § 2.7.1 | 流动计算区域与网格划分 .....                              | (61) |
| § 2.7.2 | 宏观物理量数据存储及网格点确定 .....                          | (63) |
| § 2.7.3 | 选取时间推进步长 .....                                 | (65) |
| § 2.7.4 | 选取仿真分子数 .....                                  | (66) |
| § 2.7.5 | 选取权因子 $F_{num}$ .....                          | (67) |
| § 2.7.6 | 局域宏观量的计算 .....                                 | (69) |
| 第三章     | 无结构分子稀薄气体流动的 DSMC 方法 .....                     | (73) |
| § 3.1   | 分子作用势模型 .....                                  | (73) |
| § 3.2   | 非平衡气体分子碰撞数 $Z_{ab}dg\Delta t_m$ 的表达式 .....     | (81) |
| § 3.3   | 仿真分子碰撞对抽样方法 .....                              | (86) |
| § 3.3.1 | Bird 时间计数器(Time Counter)方法 .....               | (86) |
| § 3.3.2 | Baganoff 和 McDonald 抽样方法 .....                 | (88) |
| § 3.3.3 | Bird 无时间计数器(No Time Counter)方法 .....           | (90) |
| § 3.4   | 碰撞截面表达式中未知参数的确定 .....                          | (91) |
| § 3.4.1 | 碰撞频率及平均自由程 .....                               | (91) |
| § 3.4.2 | 按输运系数确定碰撞截面参数 $\sigma_{ab}$ 及 $a_{ab}$ .....   | (92) |
| § 3.4.3 | 确定碰撞截面参数 $\sigma_{ab}$ 及 $a_{ab}$ 的半经验方法 ..... | (93) |
| § 3.5   | 碰撞的力学机理及散射模型 .....                             | (98) |
| § 3.5.1 | 碰撞的力学机理 .....                                  | (98) |
| § 3.5.2 | 散射模型 .....                                     | (99) |



|         |                                        |       |
|---------|----------------------------------------|-------|
| § 3.5.3 | 碰撞后分子运动速度的计算                           | (100) |
| § 3.6   | 物面反射机理及 DSMC 模型                        | (100) |
| § 3.6.1 | 转移几率 $R(\xi \rightarrow \xi')$ 与物面边界条件 | (100) |
| § 3.6.2 | 物面边界的现象学模型与物面调节系数                      | (103) |
| § 3.6.3 | DSMC 方法中物面边界的处理方法                      | (112) |
| § 3.7   | 分子通过外边界及对称线(或面)处理                      | (115) |
| § 3.8   | 碰撞分子能量分布函数                             | (119) |
| § 3.9   | 仿真实例                                   | (120) |
| § 3.9.1 | 瑞利(Rayleigh)流动                         | (120) |
| § 3.9.2 | 库特(Couette)流动                          | (123) |
| § 3.9.3 | 激波(Shock)结构                            | (124) |
| § 3.9.4 | 有限平板绕流                                 | (128) |
| 第四章     | 热力学非平衡流动的 DSMC 方法                      | (133) |
| § 4.1   | 松弛时间及松弛抽样几率函数推导依据                      | (133) |
| § 4.2   | 非弹性碰撞模型的选择                             | (135) |
| § 4.3   | 平动自由度松弛抽样几率                            | (138) |
| § 4.4   | 内能松弛抽样几率与松弛时间关系                        | (139) |
| § 4.5   | 转动松弛抽样几率函数                             | (142) |
| § 4.6   | 转动传能计算                                 | (146) |
| § 4.6.1 | R-R 传能计算                               | (146) |
| § 4.6.2 | T-R 传能计算                               | (148) |
| § 4.6.3 | 考虑量子效应时转动传能计算                          | (150) |
| § 4.7   | 振动松弛抽样几率函数                             | (156) |
| § 4.7.1 | 抽样几率与振动松弛宏观参量的关系                       | (156) |
| § 4.7.2 | 振动松弛抽样几率函数 $P_{vib}$                   | (158) |
| § 4.7.3 | 表达式(4-91)待定参数的确定                       | (160) |
| § 4.8   | 振动传能计算                                 | (164) |
| § 4.8.1 | T-V 传能的 McDonald 处理方法                  | (164) |
| § 4.8.2 | McDonald 方法的局限性                        | (166) |

|         |                                   |       |
|---------|-----------------------------------|-------|
| § 4.8.3 | 改进的 T-V 传能计算方法 .....              | (167) |
| § 4.8.4 | V-V 传能计算 .....                    | (169) |
| § 4.9   | 仿真实例 .....                        | (172) |
| § 4.9.1 | 静止封闭系统中分子转动能的松弛 .....             | (172) |
| § 4.9.2 | 激波层与驻点线流动 .....                   | (174) |
| § 4.9.3 | 双原子分子振动松弛抽样几率函数的 Park 修正 ..       | (178) |
| § 4.9.4 | 绕圆柱流动 .....                       | (180) |
| 第五章     | 化学反应气体流动的 DSMC 方法 .....           | (184) |
| § 5.1   | 高温气体化学动力学的一般性描述 .....             | (184) |
| § 5.2   | 双原子分子离解反应的抽样几率函数 .....            | (187) |
| § 5.2.1 | 双原子分子离解反应几率的宏观性质 .....            | (187) |
| § 5.2.2 | 双原子分子离解反应抽样几率函数 .....             | (188) |
| § 5.2.3 | 内能对双原子分子离解反应的贡献 .....             | (191) |
| § 5.2.4 | 离解反应抽样几率函数中待定参数的确定 .....          | (192) |
| § 5.3   | 单原子分子复合反应的抽样几率函数 .....            | (197) |
| § 5.3.1 | 络合物(AB)的物理特性 .....                | (197) |
| § 5.3.2 | 单原子分子复合反应几率的宏观性质 .....            | (197) |
| § 5.3.3 | 复合反应抽样几率函数 .....                  | (199) |
| § 5.3.4 | 复合反应抽样几率函数中待定参数的确定 .....          | (200) |
| § 5.4   | 化学反应细致平衡原理及其在 DSMC<br>方法中应用 ..... | (202) |
| § 5.4.1 | 关于化学反应细致平衡原理的陈述 .....             | (202) |
| § 5.4.2 | 能量分布偏倚及细致平衡原理应用 .....             | (203) |
| § 5.4.3 | $\xi_{intAB}$ 的确定 .....           | (207) |
| § 5.4.4 | 简化的化学反应抽样几率函数 .....               | (208) |
| § 5.4.5 | 热力学能量模式的反应能通量 .....               | (210) |
| § 5.4.6 | 双原子分子离解后的能量分布函数 .....             | (212) |
| § 5.4.7 | 复合反应抽样几率函数 $P_r$ 中参数的确定 .....     | (214) |
| § 5.5   | 无电离化学反应的碰撞计算 .....                | (215) |

|         |                                   |       |
|---------|-----------------------------------|-------|
| § 5.5.1 | 化学反应的能量守恒 .....                   | (215) |
| § 5.5.2 | 化学反应能量分配模型 .....                  | (217) |
| § 5.5.3 | 离解反应碰撞计算 .....                    | (219) |
| § 5.5.4 | 交换原子反应碰撞计算 .....                  | (220) |
| § 5.5.5 | 单原子分子复合反应碰撞计算 .....               | (221) |
| § 5.5.6 | 化学反应碰撞计算的细致平衡考虑 .....             | (222) |
| § 5.6   | 双原子分子振动激发与离解反应的耦合模型 ...           | (224) |
| § 5.6.1 | 双原子分子振动激发与离解反应耦合的物理化学基础<br>.....  | (224) |
| § 5.6.2 | 振动加强型离解反应的抽样几率函数 .....            | (230) |
| § 5.6.3 | 振动加强型离解反应抽样几率函数导致的能量分布偏倚<br>..... | (236) |
| § 5.6.4 | 振动加强型离解反应的碰撞计算 .....              | (240) |
| § 5.6.5 | 对应于振动加强型离解反应的复合反应抽样几率函数<br>.....  | (241) |
| § 5.7   | 电离气体流动的 DSMC 方法 .....             | (244) |
| § 5.8   | 仿真实例 .....                        | (246) |
| § 5.8.1 | 合并式电离-复合反应 .....                  | (246) |
| § 5.8.2 | 高温空气中的化学反应 .....                  | (249) |
| § 5.8.3 | 不同化学反应模型对高温空气反应系统松弛过程的影响<br>..... | (254) |
| § 5.8.4 | 热化学非平衡驻点线流动 .....                 | (255) |
| § 5.8.5 | 热力学非平衡化学反应速率常数的仿真 .....           | (258) |
| 参考文献    | .....                             | (264) |
| 附录一     | DSMC 方法中几个常用的程序 .....             | (271) |
| 附录二     | 库特流动的 DSMC 方法程序 .....             | (274) |

# 第一章 绪论

约自 1946 年起,由于高空领域进行高速飞行的可能性出现,人们对稀薄气体动力学问题的兴趣大大提高<sup>[1]</sup>。新近发展的航天器,在稀薄气体中飞行的时间越来越长,了解各类航天器在稀薄气体中飞行时的气动力、气动热变得重要起来。由于人类航天活动推动所获得的研究成果空前增多,稀薄气体动力学进入了一个崭新的发展时期<sup>[2]</sup>。本章旨在对稀薄气体动力学中与本书相关的问题作一简单阐述,并简要评述了稀薄气体动力学问题各类求解方法的优缺点。

## § 1.1 流动分区

顾名思义,稀薄气体动力学是研究稀薄气体的质量、动量、能量传递及其所发生的热力学和化学反应的规律的一门学科。它与经典气体动力学的本质区别在于连续介质假设已不再成立,已不再能应用连续介质的研究方法研究稀薄气体中所发生的各种现象。为了科学地区分稀薄气体动力学和经典气体动力学各自研究的区域,科学家定义了一个称为 Knudsen 数的无量纲参数作为气体稀薄程度的量度。这个 Knudsen 数  $K_n$  定义为

$$K_n = \frac{\bar{\lambda}}{L} \quad (1-1)$$

式中,  $\bar{\lambda}$  为气体分子的平均自由程,  $L$  为流动的特征长度,并可按照 Knudsen 数的取值范围,将流动区域作如下划分<sup>[3]</sup>。

(1)  $K_n < 10^{-3}$  为连续介质区。这时气体分子之间的碰撞频率

远大于气体分子与物体之间的碰撞频率。气体动力学中的 Navier-Stokes 方程、Fourier 热传导关系以及 Fick 质量扩散关系适用,且物面处的无速度滑移和无温度跳跃假设成立。这是经典气体动力学研究的流动区域。

(2)  $10^{-3} < K_n < 10^{-1}$  为速度滑移和温度跳跃(Velocity Slip and Temperature Jump)区。此时在气体区域内 Navier-Stokes 方程、Fourier 热传导关系以及 Fick 质量扩散关系仍然适用,但在物面上出现了速度滑移、温度跳跃和热滑移等现象。如图 1.1 所示,

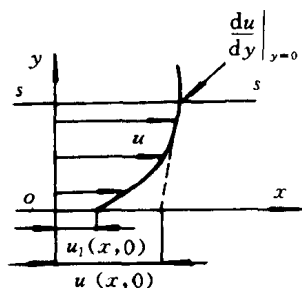


图 1.1 物面附近的温度分布

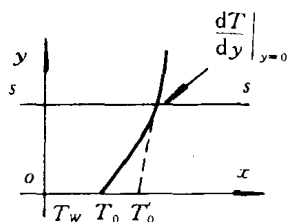


图 1.2 物面附近的温度分布

假设物面位于  $y=0$  处,运动速度为 0;气体速度  $u$  平行于  $ox$  轴,随  $y$  变化。图中  $ss$  线以及以上区域表示 Navier-Stokes 方程适用的区域。物面至  $ss$  线之间的区域为 Knudsen 边界层,在这层中气体速度如图中实线所示。当  $ss$  线处的速度和温度已知后可由 Navier-Stokes 方程求解出 Knudsen 边界层以外整个区域的解。如果设想将 Prandtl 边界层的解向 Knudsen 边界层内延伸,如图中虚线所示,并得到虚拟物面速度  $u(x,0)$ 。这一速度既不等于物面处气体的真实速度  $u_1(x,0)$ ,也不等于物面的速度(这里物面的速度为 0)。称  $u(x,0)$  与物面速度之差为滑移速度  $u_s$ 。Maxwell<sup>[4]</sup>首先导出了滑移速度  $u_s$  的表达式,在气体温度与物面温度相同时为

$$u_s = \phi \left( \frac{du}{dy} \right), \quad (1-2)$$

式中,下标“s”表示物面处的值, $\phi$ 称为滑移系数(Coefficient of Slip),具有长度的量纲,并可表示为

$$\phi = \frac{2 - \beta}{\beta} \bar{\lambda} \quad (1-3)$$

式中, $\beta$ 是气体分子在物面处的漫反射分数(漫反射分子数占总反射分子数的比例)。当物面存在温度梯度时,气体将产生称为热蠕动的切向流动。热蠕动速度 $u_c$ 为

$$u_c = \frac{3}{4} \left( \frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (1-4)$$

式中, $T$ 、 $\rho$ 与 $\mu$ 分别为气体的温度、密度与粘性系数。这时物面处的滑移速度为

$$u_s = \phi \left( \frac{du}{dy} \right)_s + \frac{3}{4} \left( \frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (1-5)$$

对于 Knudsen 边界层内的温度分布,也有类似的情形。图 1.2 中  $T'_0$  为虚拟温度,  $T_w$  为物面温度,  $T_0$  为物面处气体的真实温度, 称  $T'_0 - T_w$  为温度跳跃。如果假定物面上气体粘附性条件成立且仅有法线方向的温度梯度,则由分子动力论导出物面温度跳跃的表达式为<sup>[3]</sup>

$$T'_0 - T_w = \left( \frac{2 - \phi}{\phi} \right) \left( \frac{\gamma}{\gamma + 1} \right) \left( \frac{2}{P_r} \right) \bar{\lambda} \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (1-6)$$

式中, $\phi$ 为热调节系数 $\alpha$ 与物面漫反射分数 $\beta$ 的乘积,热调节系数 $\alpha = \frac{E_i - E_r}{E_i - E_w}$ (其中 $E_i$ 与 $E_r$ 分别表示入射于物面的分子与从物面反射回气体流场中的分子所具有的平均能量, $E_w$ 表示当反射回气体流场中的分子的温度与实际物面温度 $T_w$ 相等时气体分子所具有的平均能量), $P_r$ 为 Prandtl 数, $\gamma$ 为气体的绝热指数。(1-6)式表明,在温度跳跃区物面处的温度跳跃与物面处的气体温度梯度成正比,可引入称为温度跳跃距离的比例系数 $z$ ,将(1-6)式表示成

$$T'_0 - T_w = z \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right), \quad (1-7)$$

比较(1-7)式与(1-6)式,得温度跳跃距离  $z$  的表达式为

$$z = \left( \frac{2 - \varphi}{\varphi} \right) \left( \frac{\gamma}{\gamma + 1} \right) \left( \frac{2}{P_r} \right) \bar{\lambda} \quad (1-8)$$

理论和实验研究表明,通常由沿物面方向的气体温度梯度以及物面附近气体的速度梯度引起的温度跳跃可以忽略不计。因此物面处的温度跳跃可以很好地由(1-6)式表示。

(3)  $10^{-1} < K_n < 10^1$  为过渡(Transition)区。在这一区域中,气体分子的平均自由程  $\bar{\lambda}$  和流动特征长度  $L$  为同一量阶。气体分子之间的碰撞和气体分子与物体物面之间的碰撞对气体流动的影响具有同等的重要意义。连续介质假设不再成立,控制气体流动的方程为 Boltzmann 方程。

(4)  $K_n > 10^1$  为自由分子(Free Molecule)区。在自由分子区,分子的平均自由程远大于流动问题的特征长度。此时可以忽略气体分子之间的碰撞而仅需考虑气体分子与界面的相互作用,这一特征导致问题处理的极大简化。

在稀薄气体动力学中,往往将 Knudsen 数  $K_n$  和 Mach 数  $M_a$  ( $M_a = \frac{V_\infty}{a}$ , 其中  $V_\infty$  为来流速度,  $a$  为气体声速) 及 Reynolds 数  $R_e$  ( $R_e = \frac{\rho V_\infty L}{\mu}$ ) 联系起来。根据分子动力论,气体的粘性系数  $\mu$  可

以表示为  $\mu = \frac{1}{2} \rho \bar{c} \bar{\lambda}$ , 其中  $\bar{c} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$  为气体分子的平均热运动速率,  $k$  为 Boltzmann 常数,  $m$  为分子质量。于是分子平均自由程  $\bar{\lambda}$  与粘性系数  $\mu$  的关系为

$$\bar{\lambda} = 2\mu \left( \rho \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \right)^{-1} \quad (1-9)$$

而气体声速  $a = \sqrt{\frac{\gamma kT}{m}}$ , 于是(1-1)式可改写为

$$K_n = \sqrt{\frac{\pi \gamma}{2}} \frac{M_a}{R_e} \quad (1-10)$$

即 Knudsen 数与 Mach 数和 Reynolds 数之比  $\frac{M_a}{R_e}$  只差一个量级为 1 的因子。当研究高速飞行器表面与外界气流之间的摩擦和传热问题时,合理的特征长度是物面边界层的厚度  $\delta$ 。对于层流边界层,  $\frac{\delta}{L} \propto \frac{1}{\sqrt{R_e}}$ , 因此

$$\begin{aligned} K_n &= \frac{\bar{\lambda}}{\delta} = \frac{\bar{\lambda}}{L} \frac{L}{\delta} \\ &\propto \frac{M_a}{\sqrt{R_e}} \end{aligned}$$

当研究高速飞行器在大气中运动规律时,钱学森建议应用这里给出的 Knudsen 数对流动区域进行划分<sup>[1]</sup>。

## § 1.2 速度分布函数

分子假说认为气体是由分子组成,每个分子都在无休止地作无规则热运动,分子间频繁地发生碰撞而相互交换着动量和能量。气体的运动状态就是组成这一气体的所有分子微观运动状态的总和。如果组成气体的所有分子的运动状态都是已知的话,那么在观念上也就认为气体的运动状态是已知的。依据牛顿力学原理,只要事先确知所有气体分子的初始运动状态,就可以通过求解控制气体分子运动的微分方程组得到任一时刻气体分子的运动状态。气体分子运动的这种精确描述方法虽然在理论上来说是可行的,但在实际操作中,它存在以下三个难以克服的困难:其一,难以确定气体分子在初始时刻的运动状态,亦即初始时刻位置、速度等物理量的大小;其二,通常组成气体的分子数目非常巨大,而气体分子



间频繁的碰撞作用,又使得控制气体分子运动的微分方程是强耦合的,因此就目前的计算机发展水平而言,数值求解控制气体分子运动的微分方程组事实上不可能;其三,就是确定了每一个气体分子在任意时刻位置、速度等物理量的大小,对整个气体分子的运动状态仍缺乏一个清晰的认识。基于上述考虑,通过跟踪并求出每一个气体分子运动的方法研究气体的运动规律是不现实的。这就迫使人们引进特征几率函数对气体分子所处运动状态的几率进行统计描述。这样的描述方法比起对所有气体分子的精确描述既来得简单,又来得明了,是分子动力论基本的描述方法。

这里,从由同一类分子组分组成的称为简单气体运动状态的描述说明气体分子速度分布函数的构造。假定在某一空间域中充满着同类的  $N$  个分子组成的气体,那么在由三个物理空间坐标  $X = (x_1, x_2, x_3)$  和三个速度空间坐标  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$  构成的六维相空间  $\gamma_-$  中,  $N$  个分子则由具有坐标  $(X_i, \xi_i) (i = 1, 2, \dots, N)$  的  $N$  个点所描述并由此确定气体的运动状态。更方便的作法是定义  $6N$  维相空间  $\Gamma_-$ , 使得其坐标是所有  $N$  个分子的物理空间位置坐标和速度空间坐标。在这个相空间中,整个  $N$  个分子系统由单一点所表示。于是  $N$  个分子系统处于某一特定状态的几率  $p_N^{\Gamma_-}$  与这一空间的体积元  $dr_N dV_N$  成正比例,即有

$$\begin{aligned} p_N^{\Gamma_-}(t, r_N, V_N) &= F_N(t, r_N, V_N) dr_N dV_N \\ &= F_N(t, Z_1, \dots, Z_N) dZ_1 \cdots dZ_N \\ &= F_N(t, X_1, \dots, X_N, \xi_1, \dots, \xi_N) dX_1 \cdots dX_N d\xi_1 \cdots d\xi_N \end{aligned} \quad (1-11)$$

式中

$$\begin{aligned} r_N &= (X_1, \dots, X_N) \\ V_N &= (\xi_1, \dots, \xi_N) \\ Z_N &= (X_N, \xi_N) \end{aligned}$$